

# BAB 1

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Besi (Fe) merupakan salah satu logam yang sering dimanfaatkan dalam kehidupan manusia, karena memiliki banyak keunggulan dibanding jenis logam lain. Keunggulan-keunggulan tersebut menjadikan besi banyak diminati dalam berbagai macam aplikasi industri, seperti pembuatan konstruksi bangunan, alat transportasi, dan alat elektronik. Namun, disisi lain besi juga memiliki kekurangan yang cukup serius yaitu rentan terhadap serangan korosi.

Korosi merupakan keausan atau kerusakan yang terjadi pada material khususnya logam, akibat adanya interaksi dengan lingkungan di sekitarnya. Proses ini menyebabkan penurunan kualitas pada material logam akibat dari reaksi kimia antara logam dengan unsur-unsur lain yang berada di alam. Faktor paling umum yang mendorong terjadinya korosi pada logam yaitu adanya interaksi antara air dengan permukaan logam. Meskipun tidak dapat dihindari, korosi dapat dicegah dan dikendalikan sehingga komponen atau struktur logam dapat bertahan lebih lama [1].

Pencegahan korosi pada logam dapat dilakukan dengan mengetahui mekanisme terjadinya korosi. Mekanisme yang dapat mendorong terjadinya korosi pada besi adalah mekanisme adsorpsi dan disosiasi molekul air pada permukaan besi. Adsorpsi molekul air adalah suatu peristiwa dimana molekul-molekul air menyentuh dan menempel pada permukaan logam. Sedangkan, disosiasi molekul air merupakan proses terpisahnya molekul air menjadi ion hidrogen dan oksigen pada permukaan logam. Sehingga, penting untuk memahami proses adsorpsi dan disosiasi molekul air pada permukaan logam Fe agar dapat ditemukan cara untuk mencegah dan mengendalikan tingkat korosinya [2].

Dalam beberapa tahun terakhir, telah banyak penelitian yang mempelajari interaksi antara molekul H<sub>2</sub>O dengan permukaan Fe [3], [4], [5]. Misalnya, studi yang dilakukan oleh Hung dkk. [6] menggunakan metode *Low-Energy Electron Diffraction* (LEED) dan *Temperature programmed*

*Desorption* (TPD), menemukan bahwa gugus molekul H<sub>2</sub>O terbentuk secara bertahap pada permukaan Fe (100) paparan rendah dan akan terdisosiasi saat suhu meningkat. Mereka menyimpulkan bahwa molekul H<sub>2</sub>O teradsorpsi pada permukaan Fe (100) pada suhu 100°K, dan akan terdesorpsi pada suhu 165°K, 220°K, dan 310°K. Mereka juga menemukan bahwa molekul air hilang seluruhnya pada suhu 243°K mengarah ke hidroksil pada permukaan di situs *bridge*, dan molekul OH akan terpisah menjadi atom H dan O ketika suhu mencapai 310°K. Selain itu, banyak penelitian eksperimental telah dilakukan. Salah satunya, Dwyer dkk. [7] menemukan bahwa adsorpsi H<sub>2</sub>O pada permukaan Fe (100) menghasilkan struktur yang tidak teratur dan oksigen atau hidroksil yang terbentuk teradsorpsi pada situs *hollow* berdasarkan analisis *Low-Energy Electron Diffraction* (LEED) dan *Auger Electron Spectroscopy* (AES).

Berdasarkan studi literatur yang telah ditemukan dan sejauh yang penulis ketahui, terlihat bahwa penelitian tentang interaksi molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan logam Fe yang dilakukan dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler (DM) masih sangat terbatas. Simulasi DM adalah salah satu teknik simulasi komputasi yang digunakan untuk mempelajari gerakan dan interaksi molekul dalam suatu sistem yang dinamis. Simulasi ini didasarkan pada prinsip mekanika molekuler, yaitu gerakan atom dan molekul yang didorong oleh potensi interatomik dan gaya-gaya mekanis yang terjadi. DM dapat digunakan untuk menganalisis sistem yang terdiri dari atom dan molekul, seperti gas, cair, dan padat. Kelebihan metode ini adalah dapat menganalisis sistem dengan pendekatan molekuler, sehingga dapat menyediakan informasi yang lebih detail tentang mekanisme yang terjadi. Selain itu, juga memiliki kemampuan untuk menganalisis sistem yang sangat besar, dengan kebutuhan komputasi yang lebih ringan dan cepat. Oleh karena itu, pada penelitian ini kami menggunakan simulasi dinamika molekuler untuk menjelaskan mekanisme adsorpsi dan disosiasi molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan logam Fe (001).

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan dari latar belakang di atas, maka rumusan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana mekanisme adsorpsi molekul  $H_2O$  pada permukaan logam Fe (001) dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler?
2. Bagaimana mekanisme disosiasi molekul  $H_2O$  pada permukaan logam Fe (001) dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler?
3. Bagaimana reaksi yang terjadi antara molekul  $H_2O$  dan permukaan logam Fe (001)?

## 1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan yang ingin dicapai dari pelaksanaan penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Mengetahui mekanisme adsorpsi molekul  $H_2O$  pada permukaan logam Fe (001) dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler.
2. Mengetahui mekanisme disosiasi molekul  $H_2O$  pada permukaan logam Fe (001) dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler.
3. Mengetahui reaksi yang terjadi antara molekul  $H_2O$  dan permukaan logam Fe (001).

## 1.4 Batasan Masalah

Agar penelitian ini lebih terarah dan permasalahan yang dihadapi tidak terlalu luas, maka pada penelitian ini dilakukan pembatasan masalah sebagai berikut:

1. Simulasi dinamika molekuler dilakukan dengan arah orientasi Fe (001).
2. Untuk mempercepat proses reaksi simulasi dinamika molekuler dilakukan pada suhu 500K, 700K, dan 1700K.
3. Reaksi melibatkan molekul  $H_2O$ .

### 1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang diharapkan dari pelaksanaan penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Dapat memahami mekanisme adsorpsi molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan logam Fe (001).
2. Dapat memahami mekanisme disosiasi molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan logam Fe (001).
3. Dapat dijadikan referensi untuk penelitian selanjutnya dibidang korosi khususnya pada permukaan logam Fe (001).

